Seminário de Mecânica Quântica Aplicada

Teoria de Perturbação (Estados Degenerados): caixa potencial bidimensional e oscilador harmônico bidimensional

Victor Porto

Agosto/2022

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Conteúdo

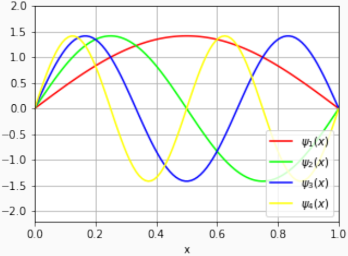
1. Caixa Potencial
    1.1. Revisitando o caso 1D
    1.2. Soluções para o caso 2D (sem perturbação)
    1.3. Aplicando uma perturbação $V = V_0xy$ para o caso 2D
2. Oscilador Harmônico
    2.1. Revisitando o caso 1D
    2.2. Soluções para o caso 2D (sem perturbação)
    2.3. Aplicando uma perturbação $V = V_0xy$ para o caso 2D
3. Discussão e Conclusão

1. Caixa Potencial

1.1 Caixa Potencial - Revisitando o caso 1D

- **eq. de Schrödinger** ind. do tempo:

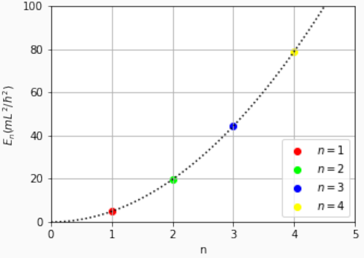
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$



$$V(x)=\begin{cases}0, & 0<x<L\\ \infty, & x\leq 0 \text{ ou } x\geq L\end{cases}$$

- **autofunções**:

$$\boxed{\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\text{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right)}$$



- **energias** associadas às autofunções:

$$\boxed{E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2}$$

$$n=1,2,3,...$$

1.2 Caixa Potencial - Soluções para o caso 2D

- **eq. de Schrödinger** ind. do tempo:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}\right)+V(x,y)\right]\psi(x,y)=E\psi(x,y)$$

$$V(x)=\begin{cases}0, & 0<x<L_x \text{ e } 0<y<L_y\\ \infty, & x\leq 0 \text{ ou } x\geq L_x\\ \infty, & y\leq 0 \text{ ou } y\geq L_y\end{cases}$$

- **autofunções**:

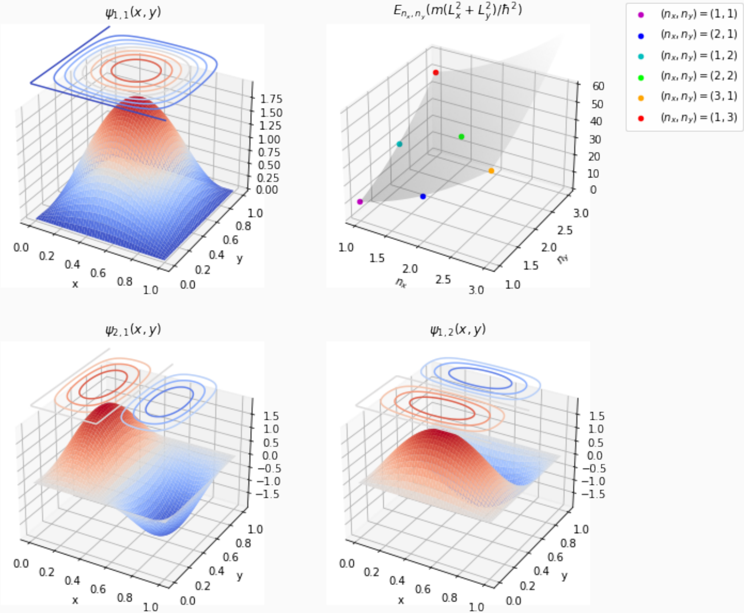
$$\boxed{\psi_n(x)=\frac{2}{\sqrt{L_xL_y}}\text{sen}\left(\frac{n_x\pi}{L_x}x\right)\text{sen}\left(\frac{n_y\pi}{L_y}y\right)}$$

- **energias** associadas às autofunções:

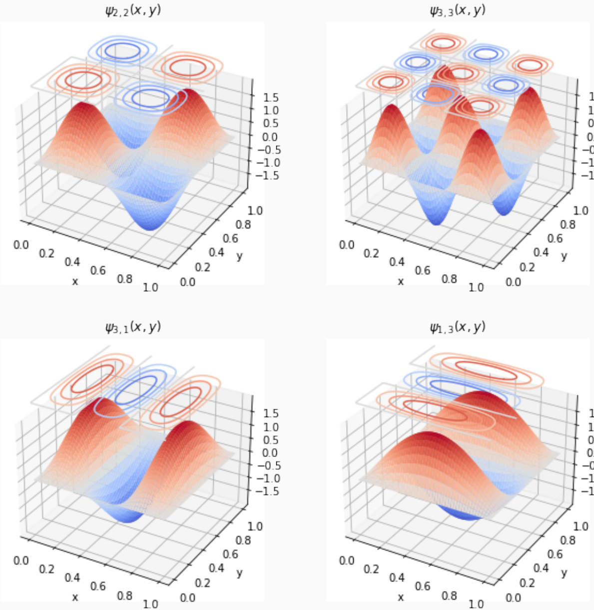
$$\boxed{E_{n_x,n_y}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2}{L_y^2}\right)}$$

$n_x=1,2,3,...;\ n_y=1,2,3,...$

1.2 Caixa Potencial - Soluções para o caso 2D



1.2 Caixa Potencial - Soluções para o caso 2D



1.3 Caixa Potencial - Aplicando uma perturbação para o caso 2D

perturbação $V = V_0 xy$

- estado fundamental é não-degenerado: $(n_x, n_y) = (1, 1)$

correção em 1ª ordem...

$$
\begin{aligned}
E_{1,1}^{(1)} &= \langle \psi_{1,1} | \, V \, | \psi_{1,1} \rangle \\
&= V_0 \langle \psi_{1,1} | \, xy \, | \psi_{1,1} \rangle \\
&= V_0 \frac{4}{L_x L_y} \int_0^{L_x} sen^2 \left(\frac{\pi}{L_x} x \right) x dx \int_0^{L_y} sen^2 \left(\frac{\pi}{L_y} y \right) y dy \\
&= V_0 \frac{4}{L_x L_y} \left(\frac{L_x^2}{4} \right) \left(\frac{L_y^2}{4} \right) \\
&= \boxed{\frac{L_x L_y}{4} V_0}
\end{aligned}
$$

1.3 Caixa Potencial - Aplicando uma perturbação para o caso 2D

- primeiro estado excitado é degenerado: $(n_x, n_y) = (2, 1)$ e $(n_x, n_y) = (1, 2)$

$$\left|\varphi_1^{(0)}\right\rangle = c_1^1 \left|\psi_{2,1}^{(0)}\right\rangle + c_1^2 \left|\psi_{1,2}^{(0)}\right\rangle = \sum_{i=1}^{2} c_1^i \left|\alpha_i^{(0)}\right\rangle$$

correção em 1ª ordem...

$$\hat{H}^0 \left|\varphi_j^{(1)}\right\rangle + \hat{V} \left|\varphi_j^{(0)}\right\rangle = E_j^{(0)} \left|\varphi_j^{(1)}\right\rangle + E_j^{(1)} \left|\varphi_j^{(0)}\right\rangle$$

$$\cancel{E_j^{(0)} \left\langle \alpha_k^{(0)} \middle| \varphi_j^{(1)} \right\rangle} + \left\langle \alpha_k^{(0)} \right| \hat{V} \left|\varphi_j^{(0)}\right\rangle = \cancel{E_j^{(0)} \left\langle \alpha_k^{(0)} \middle| \varphi_j^{(1)} \right\rangle} + E_j^{(1)} \left\langle \alpha_k^{(0)} \middle| \varphi_j^{(0)} \right\rangle$$

$$\sum_{i=1}^{n} c_j^i \left\langle \alpha_k^{(0)} \right| \hat{V} \left|\alpha_i^{(0)}\right\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_j^i E_j^{(1)} \left\langle \alpha_k^{(0)} \middle| \alpha_i^{(0)} \right\rangle$$

$$\sum_{i=1}^{n} c_j^i \left\langle \alpha_k^{(0)} \right| \hat{V} \left|\alpha_i^{(0)}\right\rangle = c_j^k E_j^{(1)}$$

$$\sum_{i=1}^{n} V_{ki} c_j^i = E_j^{(1)} c_j^k$$

$$\mathbf{V} \vec{c}_j = E_j^{(1)} \vec{c}_j$$

1.3 Caixa Potencial - Aplicando uma perturbação para o caso 2D

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{12}^* & V_{22} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
V_{11} &= V_0 \left\langle \alpha_1^{(0)} \middle| xy \middle| \alpha_1^{(0)} \right\rangle \\
&= V_0 \left\langle \psi_{2,1}^{(0)} \middle| xy \middle| \psi_{2,1}^{(0)} \right\rangle \\
&= V_0 \frac{4}{L_x L_y} \int_0^{L_x} sen^2\left(\frac{2\pi}{L_x} x\right) x dx \int_0^{L_y} sen^2\left(\frac{\pi}{L_y} y\right) y dy \\
&= \frac{L_x L_y}{4} V_0 \\
V_{22} &= V_0 \left\langle \alpha_2^{(0)} \middle| xy \middle| \alpha_2^{(0)} \right\rangle \\
&= V_0 \left\langle \psi_{1,2}^{(0)} \middle| xy \middle| \psi_{1,2}^{(0)} \right\rangle \\
&= V_0 \frac{4}{L_x L_y} \int_0^{L_x} sen^2\left(\frac{\pi}{L_x} x\right) x dx \int_0^{L_y} sen^2\left(\frac{2\pi}{L_y} y\right) y dy \\
&= \frac{L_x L_y}{4} V_0
\end{aligned}$$

1.3 Caixa Potencial - Aplicando uma perturbação para o caso 2D

$$
\begin{aligned}
V_{12} &= V_0 \left\langle \psi_{2,1}^{(0)} \middle| xy \middle| \psi_{1,2}^{(0)} \right\rangle \\
&= V_0 \frac{4}{L_x L_y} \int_0^{L_x} sen\left(\frac{2\pi}{L_x}x\right) sen\left(\frac{\pi}{L_x}x\right) xdx \int_0^{L_y} sen\left(\frac{\pi}{L_y}y\right) sen\left(\frac{2\pi}{L_y}y\right) ydy \\
&= V_0 \frac{4}{L_x L_y} \left(-\frac{8L_x^2}{9\pi^2}\right)\left(-\frac{8L_y^2}{9\pi^2}\right) \\
&= 4\left(\frac{8}{9\pi^2}\right)^2 L_x L_y V_0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{vmatrix} V_{11}-\lambda & V_{12} \\ V_{12} & V_{22}-\lambda \end{vmatrix} = 0
$$

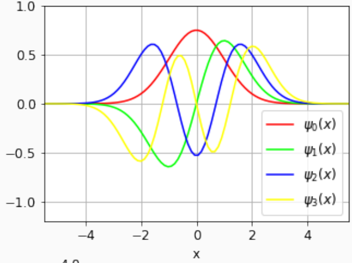
$$
\boxed{E_1^{(1)} = \lambda = \left[\frac{1}{4} \pm 4\left(\frac{8}{9\pi^2}\right)^2\right] L_x L_y V_0}
$$

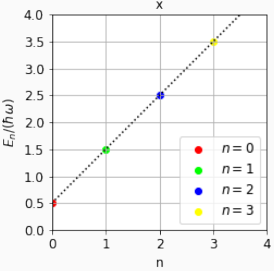
2. Oscilador Harmônico

2.1. Oscilador Harmônico - Revisitando o caso 1D

- **eq. de Schrödinger** ind. do tempo:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x)=E\psi(x)$$





- **autofunções**:

$$\boxed{\begin{aligned}\psi_n(x)=&\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\\ &\times H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\end{aligned}}$$

em que

$$H_n(z)=(-1)^n e^{z^2}\frac{d^n}{dz^n}e^{-z^2}$$

são os polinômios de Hermite

- **energias** associadas às autofunções:

$$\boxed{E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}$$

$$n=0,1,2,3,\ldots$$

2.2 Oscilador Harmônico - Soluções para o caso 2D

- **eq. de Schrödinger** ind. do tempo:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)\right]\psi(x,y)=E\psi(x,y)$$

- **autofunções**:

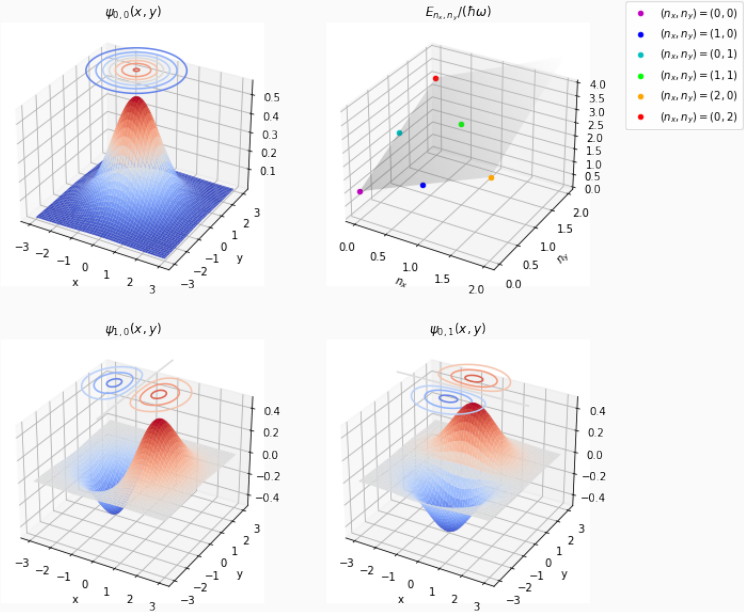
$$\boxed{\begin{aligned}\psi_{n_x,n_y}(x,y) =& \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2^{(n_x+n_y)}n_x!n_y!}}\\ &\times H_{n_x}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)H_{n_y}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}y\right)\\ &\times \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2)\right]\end{aligned}}$$

- **energias** associadas às autofunções:

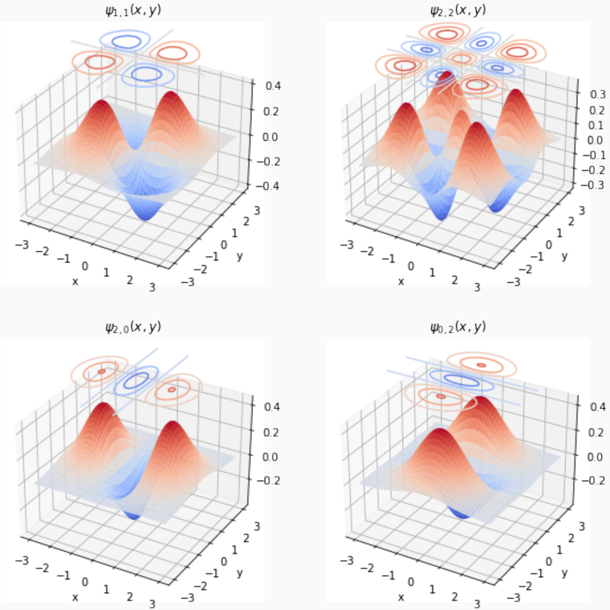
$$\begin{aligned}E_{n_x,n_y} &= \left(n_x+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\left(n_y+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\\ &= \boxed{(n_x+n_y+1)\,\hbar\omega}\end{aligned}$$

$n_x = 0, 1, 2, ...;\ n_y = 0, 1, 2, ...$

2.2 Oscilador Harmônico - Soluções para o caso 2D



2.2 Oscilador Harmônico - Soluções para o caso 2D



2.3 Oscilador Harmônico - Aplicando uma perturbação para o caso 2D

perturbação $V = V_0 xy$

- estado fundamental é não-degenerado: $(n_x, n_y) = (0, 0)$

correção em 1ª ordem...

$$
\begin{aligned}
E_{0,0}^{(1)} &= \langle \psi_{0,0} | V | \psi_{0,0} \rangle \\
&= V_0 \langle \psi_{0,0} | xy | \psi_{0,0} \rangle \\
&= V_0 \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) x dx \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} y^2\right) y dy \\
&= \boxed{0}
\end{aligned}
$$

2.3 Oscilador Harmônico - Aplicando uma perturbação para o caso 2D

- primeiro estado excitado é degenerado: $(n_x, n_y) = (1,0)$ e $(n_x, n_y) = (0,1)$

$$\left|\varphi_1^{(0)}\right\rangle = c_1^1 \left|\psi_{1,0}^{(0)}\right\rangle + c_1^2 \left|\psi_{0,1}^{(0)}\right\rangle = \sum_{i=1}^{2} c_1^i \left|\alpha_i^{(0)}\right\rangle$$

correção em 1ª ordem...

$$\mathbf{V}\vec{c}_j = E_j^{(1)}\vec{c}_j$$

$$\begin{aligned}
V_{11} &= V_0 \left\langle \psi_{1,0}^{(0)} \right| xy \left| \psi_{1,0}^{(0)} \right\rangle \\
&= V_0 ... \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} y^2\right) y dy \\
&= 0 \\
V_{22} &= V_0 \left\langle \psi_{0,1}^{(0)} \right| xy \left| \psi_{0,1}^{(0)} \right\rangle \\
&= V_0 ... \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) x dx \\
&= 0
\end{aligned}$$

2.3 Oscilador Harmônico - Aplicando uma perturbação para o caso 2D

$$
\begin{aligned}
V_{12} &= V_0 \left\langle \psi_{1,0}^{(0)} \right| xy \left| \psi_{0,1}^{(0)} \right\rangle \\
&= 2V_0 \frac{m^2\omega^2}{\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) x^2 dx \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}y^2\right) y^2 dy \\
&= 2V_0 \frac{m^2\omega^2}{\pi\hbar^2} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\right]\left[\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\right] \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega} V_0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{vmatrix} -\lambda & V_{12} \\ V_{12} & -\lambda \end{vmatrix} = 0
$$

$$
\boxed{E_1^{(1)} = \lambda = \pm \frac{\hbar}{2m\omega} V_0}
$$

3. Discussão e Conclusão

3. Discussão e Conclusão

p/ estado fundamental:
$E_{1,1}^{(1)} = \frac{L_x L_y}{4} V_0$ (caixa)
$E_{0,0}^{(1)} = 0$ (OHQ)

p/ primeiro estado excitado:
$E_1^{(1)} = \left[\frac{1}{4} \pm 4 \left(\frac{8}{9\pi^2}\right)^2\right] L_x L_y V_0$ (caixa)
$E_1^{(1)} = \pm \frac{\hbar}{2m\omega} V_0$ (OHQ)

• Apesar de a perturbação ter sido a mesma ($V = V_0 xy$) em ambos problemas, as correções de 1ª ordem para a energia difereriam tanto para o estado fundamental (não-degenerado) quando para o primeiro estado excitado (degenerado), o que já era esperado

• jupyter notebook:
`github.com/victorportog/tarefas/blob/main/220808_MQA_seminario.ipynb`

Obrigado pela atenção! :)